

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- | | |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce | <input checked="" type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor: Marek Radecki

Název práce: Study of molecular dynamic behaviour in mixtures water/ethanol.

Studijní program a obor: Fyzika kondenzovaných soustav a materiálů.

Katedra makromolekulární fyziky.

Rok odevzdání: 2009

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Jan Labuta, Ph.D.

Pracoviště: Supermolecules Group, National Institute for Materials Science (NIMS),

Namiki 1-1, Tsukuba, Ibaraki, 305-0044 Japan

Kontaktní e-mail: Labuta.Jan@nims.go.jp

Odborná úroveň práce:

- ☒ vynikající ☐ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Věcné chyby:

- ☒ téměř žádné ☐ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ☐ méně podstatné četné ☐ závažné

Výsledky:

- ☒ originální ☐ původní i převzaté ☐ netriviální kompilace ☐ citované z literatury ☐ opsané

Rozsah práce:

- ☐ veliký ☒ standardní ☐ dostatečný ☐ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- ☐ vynikající ☐ velmi dobrá ☒ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Tiskové chyby:

- ☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ☐ četné

Celková úroveň práce:

- ☐ vynikající ☒ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

1) Odborná úroveň práce a výsledky:

Autor se v první části diplomové práce zabývá studiem směsí voda/ethanol pomocí NMR spektroskopie. Měřeny jsou změny v ^1H spektrech, hodnoty ^1H příčné relaxační doby T_2 , hodnoty ^1H difúzních koeficientů a hodnoty ^{13}C podélné a příčné relaxační doby T_1 a T_2 ethanolu. V závěrech této části je diskutována stabilita vodíkových vazeb, potažmo velikosti klastrů voda-ethanol, určené z chemických posuvů v ^1H spektrech. Dále autor uvádí srovnání poloměru klastrů určených z ^{13}C T_1 relaxačních měření a z měření ^1H translační difúze, což považují za velmi zajímavé. V obou případech se jedná o originální výsledky.

Druhá část práce je zaměřena na studium roztoků voda/ethanol a voda/ethanol/polyvinylmethylether (PVME) metodou diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Je studován široký rozsah koncentrací jak ethanolu tak PVME ve vodě. Mezi zajímavé výsledky jistě patří vliv PVME na teplotu a entalpii tání a krystalizace rozpouštědla. Taktéž je velmi dobře zpracován fázový diagram teplota-obsah PVME (Fig. 9.20) pro vzorky PVME/voda, kde jsou uvedeny všechny charakteristické fázové změny v celé měřitelné oblasti koncentrací PVME. Je zde též spočtena teoretická závislost teploty skelného přechodu pro různé PVME koncentrace za použití Couchman-Karaszova vztahu.

2) Grafická, jazyková, formální úroveň:

Po grafické stránce práce působí konzistentně bez zjevných nedostatků. Co se týče anglického textu je jistě co zlepšovat, nicméně textu lze snadno rozumět. Překvapivé je, že v době textových editorů s kontrolou angličtiny práce obsahuje nezvykle vysoký počet chyb ve „spellingu“. Jako příklad uvádím stranu 11 odstavec 3. a 5.: „discribing“, „directely“, „frenvency“, „abiabatic“, „measurments“, „absorbtion“. Užití horních indexů u rovnic a jednotek ve formě číslic, jako odkazu na poznámku pod čarou, je poněkud matoucí a vede k záměně s mocninou (viz. str. 14, 27 a 28). V grafech se často stává, že zobrazované body a křivky leží přímo na osách grafu (např.: Figs. 6.6, 6.9b, 9.2b, 9.5b, 9.11b, ...), což komplikuje orientaci. Grafy 9.14a/b obsahují zcela nevhodné měřítko na y-ové ose. V popisu konfigurace experimentů (str. 27 a 28) autor uvádí hodnotu echo času i u sekvencí, kde se tento parametr neužívá (^{13}C NMR spektrum a T_1 ^{13}C NMR experiment). Poslední řádek na straně 16 obsahuje termín „root mean deviation“, jedná se však o varianci. V grafu 9.17 (str. 57) chybí jednotky na y-ové ose.

3) Celková úroveň práce:

Přestože se v práci vyskytuje celá řada formálních nedostatků, autor prezentuje množství originálních výsledků na systémech voda/ethanol a PVME/voda/ethanol. Rovněž je patrné, že autor dobře zvládá experimentální techniku, a to jak NMR, tak DSC. Práci jako celek, ve svém rozsahu a obsažených výsledcích, doporučuji uznat jako diplomovou a hodnotím stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Velikost klastrů určená z ^{13}C T_1 relaxačních měření a z ^1H translační difúze jeví zcela opačnou tendenci v závislosti na teplotě. Mohl by autor nějak hlouběji osvětlit toto chování?
- 2) Při zpracování DSC měření, např. na str. 49 graf 9.3a, je vynášena teplota v maximu peaku. Běžně se uvádí tzv. onset teplota, protože nezávisí na hmotnosti měřeného vzorku. Mělo by užití onset teploty nějaký vliv na interpretaci výsledků?
- 3) V grafu 9.10 (str. 53) je znázorněna entalpie taní a krystalizace rozpouštědla a v příslušném komentáři se uvádí, že vzorky s vyšší koncentrací PVME mají nižší entalpii přechodu, protože je v nich obsaženo méně rozpouštědla. Proč je entalpie počítána na hmotnostní jednotku roztoku a ne na hmotnostní jednotku rozpouštědla? Obdobná situace je i v grafu 9.16 a komentáři k němu.
- 4) DSC měření pro PVME/ethanol (graf 9.15a), dle mého názoru, nevykazuje zřetelně žádný fázový přechod, nicméně graf 9.15b znázorňuje jakýsi „extreme shifting“, což jsou očividně hodnoty maxima baseline po začátku měření (i jednotky na y-ové ose tomu nasvědčují). Mohl by autor objasnit co se stalo s krystalizací?
- 5) V posledním odstavci strany 59 je zmíněno množství nemrznoucí vody ve vzorcích PVME/voda/ethanol. Je pravdou, že práce není zaměřena na toto téma, nicméně graf znázorňující množství nemrznoucí vody jako hmotnostní zlomek ($m_{\text{nonfreeze}}/(m_{\text{freeze}} + m_{\text{nonfreeze}})$) pro různé koncentrace PVME by byl přínosný.

Práci

☒ doporučuji

☐ nedoporučuji

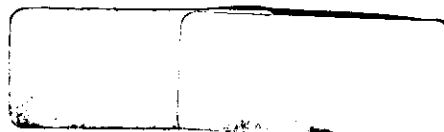
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☒ výborně ☐ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Tsukuba, 16.9.2009



Jan Labuta